

<b>Titre Thèse</b> <b>Title</b>	Tailoring the electrical properties of transition metal dichalcogenides monolayer by molecule grafting Adaptation des propriétés électriques de la monocouche de dichalcogénures de métaux de transition par greffage de molécule	
<b>(Co)-Directeur</b>	Stéphane LENFANT	E-mail : <a href="mailto:stephane.lenfant@iemn.fr">stephane.lenfant@iemn.fr</a>
<b>(Co)-Directeur</b>		E-mail :
<b>(Co)-Encadrante (s)</b>	Sylvie GODEY Imen HNID	E-mail : <a href="mailto:sylvie.godey@iemn.fr">sylvie.godey@iemn.fr</a> E-mail : <a href="mailto:imen.hnid@iemn.fr">imen.hnid@iemn.fr</a>
<b>Laboratoire(s)</b>	IEMN	Web : <a href="https://www.iemn.fr">https://www.iemn.fr</a>
<b>Groupe(s)</b>	<a href="#">NCM / Pôle Cham Proche</a>	Web :
<b>Financement acquis ?</b>	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input checked="" type="checkbox"/>
	Origine :	
<b>Financement demandé</b>	Contrat Doctoral <input type="checkbox"/>	Etablissement porteur : Univ. Lille <input type="checkbox"/> Centrale Lille <input type="checkbox"/> JUNIA <input type="checkbox"/>
	Région <input checked="" type="checkbox"/>	Co-financement acquis : Oui <input checked="" type="checkbox"/> Non <input type="checkbox"/> Préciser son origine (qu'il soit acquis ou non) : ANR COMODES (PRC-CE09)
	Autre :	

### Résumé:

Les progrès réalisés dans la recherche de nouveaux matériaux 2D tels que les dichalcogénures de métaux de transition (TMD) de type MX<sub>2</sub> (M = Mo, W, Pt ; X=S, Se, Te) ouvrent une nouvelle voie pour la fabrication de structures nanométriques de faible dimension dotées de propriétés électroniques, optiques et mécaniques uniques [1]. Afin d'ajuster les propriétés électroniques, le dopage de la monocouche de TMD par le greffage covalent de molécules de thiol offre des possibilités supplémentaires pour ces systèmes [2].

Dans le cadre du projet ANR COMODES, notre objectif principal est d'étudier la modification des propriétés de la monocouche de TMD (WSe<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub> et PtSe<sub>2</sub>) avec différentes molécules greffées sur la monocouche. Les molécules considérées ici sont des molécules thiol formant une liaison covalente avec la monocouche. Différentes molécules thiolées (alkyle, phényle...), avec différentes longueurs, et différents groupes terminaux (-H, -CH<sub>3</sub>, -F ou -CF<sub>3</sub>) seront étudiés dans le projet. Les caractérisations seront effectuées à l'échelle nanométrique à l'aide de microscopes à sondes locales (dans l'air ou sous ultravide à basse température). L'étude des propriétés des monocouches de TMD portera sur (i) la densité et l'homogénéité des molécules greffées à l'aide de l'AFM et du STM; (ii) le travail de sortie mesurée par KPFM ; (iii) la conductivité par C-AFM, et (iv) les caractéristiques courant-tension (I=f(V)) par STM.

L'objectif final sera (i) d'étudier l'impact de la structure de la molécule sur les propriétés de la monocouche de TMD; et (ii) d'identifier le meilleur couple TMD/molécule pour l'émission de champ, en collaboration avec les partenaires du projet COMODES.

Ce projet ouvre la voie à la démonstration d'une nouvelle source de pointe à émission de champ terminée par des monocouches fonctionnelles.

### Abstract:

Progress in research and development of novel 2D materials such as transition metal dichalcogenides (TMD) of the type MX<sub>2</sub> (M = Mo, W, Pt; X=S, Se, Te) opens a new way for the fabrication of low-dimensional nanometer structures with unique electronic, optical, and mechanical properties [1]. In order to tune the electronic properties, the doping of the TMD monolayer by the covalent grafting of thiol molecules offers additional possibilities for these systems [2].

In the framework of the ANR project COMODES, our main goal is to investigate the modification of the TMD (WSe<sub>2</sub>, MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub> and PtSe<sub>2</sub>) monolayer properties with different molecules grafted on the monolayer. The molecules considered here are thiol molecules forming a covalent bond with the monolayer. Different thiol molecules (alkyl, phenyl...), with different lengths, and different terminal groups (-H, -CH<sub>3</sub>, -F or -CF<sub>3</sub>) will be investigated in the project. Characterizations will be done at the nanoscale by using scanning probe microscopes (in air or in ultra-high vacuum and at low temperature). The TMD monolayer properties study will be (i) the density and homogeneity of molecules grafted with the help of AFM; STM; (ii) the work function by KPFM; (iii) conductivity by C-AFM, and (iv) current-voltage characteristics (I=f(V)) by STM.

The final goal will be to (i) study the impact of the molecular structure on the TMD monolayer properties, and (ii) identify the best couple TMD/molecule for field emission, in collaboration with the partners of the project COMODES.

This project paves the way for the demonstration of a new field emission tip source terminated by functional monolayers.

[1] Mamta; Singh, Y.; Maurya, K. K.; Singh, V. N. Transition metal dichalcogenide MXY (M=Mo, W; X, Y = S, Se) monolayer: Structure, fabrication, properties, and applications. *Journal of Materials Research* **2022**. DOI: [10.1557/s43578-022-00643-w](https://doi.org/10.1557/s43578-022-00643-w).

[2] Sim, D. M.; Kim, M.; Yim, S.; Choi, M.-J.; Choi, J.; Yoo, S.; Jung, Y. S. Controlled Doping of Vacancy-Containing Few-Layer MoS<sub>2</sub> via Highly Stable Thiol-Based Molecular Chemisorption. *ACS Nano* **2015**, 9 (12), 12115-12123. DOI: [10.1021/acsnano.5b05173](https://doi.org/10.1021/acsnano.5b05173).